
**ANÁLISIS DEL INTERACTOMA DE LA PROTEÍNA KCTD5 MEDIANTE LA
PLATAFORMA WEB PPI-MASS**

**SIMÓN FELIPE ZÚÑIGA ALMONACID
INGENIERO CIVIL EN BIOINFORMÁTICA**

RESUMEN

Existe una gran cantidad de enfermedades humanas que han sido vinculadas a interacciones proteína-proteína (PPIs). El interactoma humano se compone de más de 600.000 complejos proteicos, los cuales se asocian a una gran diversidad de procesos celulares fundamentales para el correcto funcionamiento y desarrollo del organismo. Un caso de especial interés es el interactoma de la proteína KCTD5, la cual ha mostrado regular canales iónicos y estar asociada con cáncer de mama y la formación de ciertos tumores. Una manera de estudiar proteínas que regulan la función de KCTD5 es mediante ensayos de espectrometría de masas (MS); sin embargo, el post-procesamiento de datos resultantes de MS no es trivial y actualmente existen limitadas herramientas informáticas que brinden al usuario flexibilidad y transparencia para manejar e interpretar los datos. En este sentido, el presente proyecto de tesis describe el desarrollo de una plataforma web para el análisis de datos obtenidos a través de experimentos de MS, integrando información de diferentes bases de datos biológicas y permitiendo al usuario emplear determinados filtros para identificar complejos proteína-proteína con potencial farmacológico. El desempeño de la plataforma PPI-MASS, ha sido inicialmente evaluado usando como parámetros de entrada datos de MS vinculados a la proteína KCTD5. Sin embargo, se prevé su uso para el análisis y detección de cualquier conjunto de PPIs proveniente de experimentos de MS. Cabe señalar, que la detección de PPIs es fundamental para el diseño de fármacos basado en estructura, por lo tanto, se espera que esta plataforma sea un gran aporte en el área biomédica.

ABSTRACT

A large number of human diseases have been linked to protein-protein interactions (PPIs). The human interactome comprises over 600.000 protein complexes, which are associated with a wide variety of cell processes essential for the correct function and development of the human organism. One case of particular interest is the KCTD5 protein interactome. KCTD5 has been shown to regulate ion channels and to be associated with breast cancer and the formation of certain tumors. One way of studying the proteins that regulate the function of KCTD5 is through mass-spectrometry assays (MS); however, the post-processing of the resulting data is not a trivial task. Moreover, there are currently few computational tools that give the user flexibility and transparency to manage and interpret the data. In that regard, this thesis project describes the development of a web platform for the analysis of data obtained through MS assays, incorporating information from different biological databases and allowing the user to employ specific filters to identify protein-protein complexes with pharmaceutical potential. The performance of the PPI-MASS platform has been initially evaluated using MS data associated with the KCTD5 protein as input. However, we expect its use to analyze and detect any set of PPIs from MS assays. It is important to note that the detection of PPIs is essential for structure-based drug design and, because of this, we expect that this platform will be of great assistance in the biomedical field.